

A. I. Kaplinskii, A. I. Propoi, Nonlocal optimization methods that use potential theory, *Avtomat. i Telemekh.*, 1993, Issue 7, 55–65

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

http://www.mathnet.ru/eng/agreement

Download details:

IP: 67.81.248.28

August 4, 2022, 18:30:58



Стохастические системы

УДК 517.977

© 1993 г. А.И. КАПЛИНСКИЙ, канд. техн. наук (Воронежский государственный университет),

А.И. ПРОПОЙ, д-р техн. наук (Институт системного анализа РАН, Москва)

МЕТОДЫ НЕЛОКАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ, ИСПОЛЬЗУЮЩИЕ ТЕОРИЮ ПОТЕНЦИАЛА

Рассматривается подход, основанный на замене задачи минимизации функции многих переменных на эквивалентную рандомизированную задачу. В результате вариации функционала рандомизированной задачи показано, что исходная задача сводится к максимизации потенциальной функции, являющейся решением некоторой краевой задачи математической физики. Рассмотрены методы первого и второго порядка (аналоги градиентного спуска и метода Ньютона применительно к потенциальной функции), которые для своей реализации требуют лишь значения исходной функции. На основе анализа свойств потенциальной функции выявлены основные структурные свойства нелокального поиска: неустойчивая составляющая в неперспективной области поиска, операции отражения и растяжения соответственно в неперспективном и перспективном направлении.

1. Введение

Методы решения экстремальных задач к настоящему времени достаточно хорошо разработаны. Однако эти методы в основном ориентированы на решение "хороших" задач (выпуклых, гладких, детерминированных) и основаны на использовании локальной информации (типа "градиент в точке"). Принципиальная черта "плохих" экстремальных задач (невыпуклых, негладких, недетерминированных) состоит в том, что они требуют нелокальной информации в процессе их решения.

Общим путем введения нелокальности является рандомизация исходной задачи. Для задач нелинейного програмирования это было сделано в [1–4]. Методы решения таких задач основывались на стохастической модификации (обычного) градиента и приводили к вероятностным итеративным методам их решения (см., например, [4–6]).

Цель настоящей работы — рассмотреть альтернативный (двойственный) подход к понятию градиента в негладкой оптимизации и следующие из него методы. Это направление имеет глубокие корни с методами адаптации и обучения [7], теорией потенциальных функций [8], математической теорией систем [9] и сформировалось сравнительно недавно [10–17].

В работе в систематизированном виде изложены основы теории этого направления. Рассмотрена вариация первого порядка функционала рандомизированной задачи. Даны условия, которым должно удовлетворять усредненное векторное поле, приводящее к улучшению решения. В результате его разложения на потенциальную и "бездивергентную" составляющую показано, что исходную задачу можно свести к максимизации потенциальной

функции, являющейся решением краевой задачи математической физики. Рассмотрены методы первого и второго порядка (аналоги градиентного спуска и метода Ньютона применительно к потенциальной функции), для реализации которых требуется вычисление лишь значений исходной функции. Показано, каким способом можно учитывать априорные сведения о задаче (учет дифференциальных свойств целевой функции, предположений о локализации решения). На основе анализа свойств потенциальной функции выявлены основные структурные свойства нелокального поиска: неустойчивая компонента в неперспективной области, операции отражения и растяжения пространства в неперспективном и перспективном направлениях поиска.

2. Рапдомизация задачи

Рассматривается задача безусловной оптимизации

(1)
$$f(x) \to \min$$

где функция $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

При построении методов решения задачи (1) будем ориентироваться на "плохую" функцию f, предполагая, что в общем случае измеримы лишь значения f(x). Однако при этом хотелось бы иметь технологию построения таких методов решения (1), которые учитывали бы уровень информированности о решаемой задаче (знание производных, области локализации решения и т.д.).

Для этой цели переформулируем задачу (1), вводя распределение x, т.е. осуществляя рандомизацию (1):

(2)
$$F(X) = E[f(X)] \to \min_{X \in \{X\}}.$$

Здесь $\{X\}$ – множество допустимых случайных векторов со значениями в R^n . Задача (2) может быть также переписана в виде

(3)
$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x) p(x) dx \to \min_{p(x)},$$

где p(x) — плотность распределения вероятностей случайного вектора X, понимаемая, вообще говоря, в обобщенном смысле.

Возможность замены задачи (1) на рандомизированную (2) основана на следующих утверждениях.

Предложение 1. Если множество случайных векторов $\{X\}$ включает в себя множество дискретно распределенных векторов, т.е. множество допустимых распределений p(x) включает δ -функции, то

(4)
$$\min_{x \in R^n} f(x) = \min_{X \in \{X\}} E[f(X)].$$

Предложение 2. Пусть X^* – случайный вектор с распределением $p^*(x)$ – решение (2). Тогда любая точка $x^* \in R^n$, для которой f(x) непрерывна и при

$$||x-x^*|| \le \varepsilon \int_{\|x-x^*\| \le \varepsilon} p^*(x) dx > 0$$
, будет решением задачи (1).

Доказательство этих предложений достаточно очевидно и может быть найдено, например, в [11].

Рассмотрим задачу нелинейного программирования

(5)
$$\omega = \{ \min f(x) | f_j(x) \le 0, j = 1, ..., m, x \in \mathbb{R}^n \}$$

и ее рандомизацию [2]:

(6)
$$\overline{\omega} = \{ \min \int_{\mathbb{R}^n} f(x) p(x) dx | \int_{\mathbb{R}^n} f_j(x) p(x) dx \leq 0, j = 1, \dots, m \}.$$

В этом случае, в отличие от (4), $\overline{\omega} \le \omega$. Это происходит потому, что множество допустимых решений (6), вообще говоря, шире, чем в (5) (ограничения в (6) могут выполняться лишь в среднем). Если же (5) — задача выпуклого программирования, то имеют место утверждения относительно эквивалентности задач (5) и (6), аналогичные предложениям 1 и 2.

Вариантом задачи (2) является задача

(7)
$$\overline{\omega}_{\Omega} = \{ \min_{\Omega} \int_{\Omega} f(x) p(x) dx | x \in \Omega \},$$

где Ω — некоторое множество в R^n , причем $\int\limits_{\Omega} p(x)dx=1$ (например, Ω может характеризовать априорную информацию о локализации решения задачи). В этом случае также имеют место утверждения об эквивалентности задач, даже если множество Ω невыпукло (так как здесь рандомизируется целевая функция, а не ограничения).

3. Вариация рапдомизировапного функционала

Для решения задачи (2) будем рассматривать итеративные процедуры, имеющие в пространстве случайных векторов обычный вид

$$(8) X_{N+1} = X_N + \varepsilon_N Y_N.$$

Здесь Y_N – случайное направление изменения X_N с совместной плотностью распределения $p_N(x, y)$, ε_N – длина шага вдоль Y_N .

Для нахождения Y_N определим $\delta_Y F(X)$ – производную функционала (2) в состоянии X по направлению Y.

По определению

(9)
$$\delta_{Y}F(X) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{F(X + \varepsilon Y) - F(X)}{\varepsilon} = \frac{d}{d\varepsilon} [F(X + \varepsilon Y)]_{\varepsilon = 0} = \frac{d}{d\varepsilon} [F(X_{\varepsilon})]_{\varepsilon = 0} =$$

$$= \left[\frac{d}{d\varepsilon} \int_{R^{n}} f(x) p_{\varepsilon}(x) dx \right]_{\varepsilon = 0},$$

где плотность распределения $p_{\varepsilon}(x)$ случайного вектора $X_{\varepsilon} = X + \varepsilon Y$ может быть выражена через совместную плотность

(10)
$$p_{\varepsilon}(x) = \int_{R^n} p(x - \varepsilon y, y) dy.$$

Предполагая выполненными условия дифференцируемости интегралов по параметру (они всегда могут быть обеспечены соответствующим выбором распределений), получим

(11)
$$\delta_Y F(X) = \left[\frac{d}{d\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \int_{\mathbb{R}^n} p(x - \varepsilon y, y) dy dx \right]_{\varepsilon = 0} = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{d}{d\varepsilon} [A_{\varepsilon} f(y)]_{\varepsilon = 0} dy.$$

Здесь

(12)
$$A_{\varepsilon}f = \int_{R^n} f(x)p(x-\varepsilon y, y)dx$$

- оператор псевдодифференциального типа [18].

Для вычисления (11) воспользуемся известным соотношением векторного анализа

$$\left[\frac{d}{d\varepsilon}p(x-\varepsilon y,y)\right]_{\varepsilon=0} = -\left(\frac{\partial p(x,y)}{\partial x},y\right) = -\operatorname{div}_{x}[p(x,y)y],$$

где (,) – скалярное произведение в R^n , div $f = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}$. В результате

$$\delta_{Y}F(X) = -\int_{R^{n}} \int_{R^{n}} f(x) \left(\frac{\partial p(x,y)}{\partial x}, y \right) dy dx =$$

$$= -\int_{R^{n}} \int_{R^{n}} f(x) \operatorname{div}_{x} \left[p(x,y)y \right] dy dx = -\int_{R^{n}} \int_{R^{n}} f(x) \operatorname{div}_{x} \left[\int_{R^{n}} p(x,y)y dy \right] dx.$$

Используя условную плотность вероятности p(x, y) = p(x)p(y|x) и обозначая

(13)
$$\overline{y}(x) = \int_{\mathbb{R}^n} yp(y|x)dy = E[Y|X=x],$$

перепишем последнее выражение в виде

$$\delta_{Y}F(X) = -\int_{R^{n}} f(x)\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)]dx.$$

Дифференцируя по ε тождество $\int\limits_{R^n} p_\varepsilon(x) dx \equiv 1$, получим

(14)
$$\int_{R^n} \operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)]dx = 0.$$

Окончательно получим для производной F по направлению Y выражение

(15)
$$\delta_{\gamma}F(X) = -\iint_{R^n} [f(x) - c] \operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)] dx,$$

где c – произвольная константа.

Направление Y, которое приводит к уменьшению F, должно удовлетворять неравенству $\delta_Y F(X) \le 0$. В частности, оно будет выполняться, если

$$\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)] = [f(x) - c]p_U(x), p_U(x) \ge 0.$$

Подробно выполнение этого неравенства обсуждается в следующем разделе. Пусть функция f(x) имеет непрерывные производные первого порядка. Тогда $\delta_Y F(X)$ может быть представлена в виде

$$\delta_{Y}F(X) = \left[\frac{d}{d\varepsilon} \int_{R^{n}} \int_{R^{n}} f(x+\varepsilon y) p(x,y) dx dy\right]_{\varepsilon=0} =$$

$$= \int_{R^{n}} \int_{R^{n}} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x}, y\right) p(x,y) dx dy = \int_{R^{n}} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x}, \overline{y}(x)\right) p(x) dx,$$

где $\overline{y}(x)$ определено в (13).

Таким образом, производная по направлению $\delta \gamma F(X)$ имеет два эквивалентных представления:

(16)
$$\delta_{Y}F(X) = \int_{\mathbb{R}^{n}} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x}, \overline{y}(x) \right) p(x) dx = -\int_{\mathbb{R}^{n}} (f(x) - c) \operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)] dx.$$

Первое представление в (16) ведет к известным вероятностным итеративным методам оптимизации (типа стохастической аппроксимации) [7], в то время как второе представление в (16) является основой новых методов, которые будут рассмотрены в следующем разделе.

4. Понятие градиента в негладкой оптимизации

Определим теперь направление Y, которое максимизирует $\delta_Y F(X)$ (при некоторых естественных ограничениях на Y, чтобы избежать бесконечных решений). Такое направление будем называть градиентным. Для этой цели воспользуемся обобщенным неравенством Шварца с весовой функцией $p_U(x)$:

(17)
$$|\delta_{Y}F(X)| = \left(\int_{\mathbb{R}^{n}} (f(x) - c)^{2} p_{U}(x) dx\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^{n}} \left\{\frac{\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)]}{p_{U}(x)}\right\}^{2} p_{U}(x) dx\right)^{\frac{1}{2}},$$

где $p_U(x) > 0$ может рассматриваться как плотность распределения вероятности некоторого случайного вектора U. Соответствующий выбор $p_U(x)$ позволяет обеспечить существование интегралов в (17).

Из (17) следует, что максимизация $\delta_Y F(X)$ по Y приводит к уравнению

$$\frac{\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)]}{p_U(x)} = \lambda(f(x) - c), \lambda > 0$$

или

(18)
$$\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)] = \lambda(f(x) - c)p_U(x),$$

где теперь вследствие (14) постоянная с определяется равенством

(19)
$$c = \int_{R^n} f(x) p_U(x) dx.$$

Если ограничить "длину" вектора У:

(20)
$$\int_{R^n} \left\{ \frac{\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)]}{p_U(x)} \right\}^2 p_U(x) dx = \alpha^2,$$

где $\alpha > 0$ задана, то параметр λ в (18) определится как

(21)
$$\lambda = \alpha \left[\int_{\mathbb{R}^n} (f(x) - c)^2 p_U(x) dx \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

Соответствующая величина $\delta_Y F(X)$:

(22)
$$\delta_{Y}F(X) = \alpha \left[\int_{\mathbb{R}^{n}} (f(x) - c)^{2} p_{U}(x) dx \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Если функцию $p_U(x)$ интерпретировать как плотность распределения вероятности случайного вектора U, то (22) и (19) можно переписать в виде

(23)
$$\delta_Y F(X) = \alpha \{\sigma^2[f(U)]\}^{1/2}, \quad c = E[f(U)],$$

где $\sigma^2[f]$ – дисперсия f(U).

Суммируем полученные результаты.

Предложение 3. Градиентное направление Y, определяемое векторным полем (13), которое максимизирует $\delta_Y F(X)$ при ограничениях (14), (20), удовлетворяет уравнениям (18), (19). Соответствующее значение $\delta_Y F(X)$ при этом направлении определяется (22) или (23).

Градиентное направление определено с точностью до функции $p_U(x) > 0$. Концентрируя $p_U(x)$ в произвольной точке $x_0: p_U(x) \to \delta(x-x_0)$, можно уменьшить нелокальность поиска: $\delta_Y F(X) \to 0$ в (23). Наоборот, увеличение нелокальности поиска достигается за счет концентрации плотности $p_U(x)$ в точках максимума и минимума f (что приводит к максимизации дисперсии (23)).

Легко видеть близость приведенных конструкций с выводом неравенства Крамера—Рао [19]. В частности, интеграл в (20) можно ассоциировать с функцией информации Фишера и интерпретировать как меру информации, доставляемой случайным вектором U (который, в соответствии с замечанием, сделанным выше, характеризует нелокальность поиска).

5. Потепциальная функция

Приведенное понятие градиентного векторного поля пока неконструктивно, поскольку множество решений (18) бесконечно. Для описания множества решений этого уравнения воспользуемся возможностью представления финитного или исчезающего на бесконечности векторного поля $p(x)\overline{y}(x)$ в виде

(24)
$$p(x)\overline{y}(x) = \nabla \varphi(x) + w(x),$$

(25)
$$\operatorname{div} w(x) = 0.$$

При дополнительном условии $\phi|_{\infty}=0$ такое представление является однозначным. Учитывая, что div grad $\phi=\Delta\phi$, где Δ – оператор Лапласа, получим из (18), (24), (25)

(26)
$$\Delta \varphi = -\lambda [f(x) - c] p_U(x).$$

Таким образом, потенциальная функция, характеризующая градиентное направление, должна удовлетворять уравнению Пуассона (в неограниченной среде). Его решение, стремящееся к нулю на бесконечности (что естественно допустить в силу свойств плотности $p_U(x)$), единственно и имеет вид

(27)
$$\varphi(x) = -\lambda \int_{R''} E(x,\zeta) f(\zeta) - c) p_U(\zeta) d\zeta,$$

где $E(x,\zeta)$ – фундаментальное решение уравнения Лапласа.

Из (27) получим выражение для градиента потенциальной функции:

(28)
$$\nabla \varphi(x) = -\lambda \int_{R^n} \nabla_x E(x, \zeta) (f(\zeta) - c) p_U(\zeta) d\zeta$$

или

(29)
$$\nabla \varphi(x) = -\lambda E[f(U) - c) \nabla_x E(x, U)].$$

Таким образом, в достаточно общих предположениях о функции f, затрагивающих, по существу, лишь ее интегральные свойства (имеется в виду законность операции дифференцирования интеграла по параметру (11)), было получено представление (24), (25), (28) для направления движения, обеспечивающее максимизацию производной по направлению функционала F(X) в экстремальной задаче (2), эквивалентной исходной задаче (1). Такое представление (также при общих и естественных предположениях) единственно. Поэтому вектор $\nabla \phi$ в (28) может рассматриваться как градиент исходной функции f, использующий в своем выражении лишь ее значения; ньютоновский потенциал ϕ (27) может интерпретироваться как "портрет", модель исходной функции f. Эта модель определяется случайным вектором U или, в соответствии с (19), (23), средним значением f по распределению U и меняется при изменении наших знаний о минимальной величине f: $\phi = \phi(x; c)$.

Изложение этого раздела в основном следует [16]. Отметим в заключение, что потенциальная функция вида (27) для поиска глобального экстремума на эвристической основе использовалась в [20].

6. Численные методы

В этом разделе кратко рассмотрим численные методы, использующие потенциал ф (подробнее см. [12, 13]).

Методы первого порядка могут быть записаны в виде

(30)
$$X_{N+1} = X_N - \varepsilon_N \nabla \varphi_N(X_N),$$

где $\nabla \phi_N$ определен в (28), (29) при $c=c_N$, $p_U=p_{U_N}(x)$. Вследствие представления $\nabla \phi$ в виде математического ожидания (29), в (30) естественно воспользоваться вероятностными итеративными методами, использующими реализации случайных векторов [7, 21]. В этом случае длина шага должна удовлетворять известным условиям:

(31)
$$\sum_{N=0}^{\infty} \varepsilon_N = \infty, \quad \sum_{N=0}^{\infty} \varepsilon_N^2 < \infty, \quad \varepsilon_N > 0.$$

Методы второго порядка имеют вид

(32)
$$X_{N+1} = X_N - [\nabla^2 \varphi_N(X_N)]^{-1} \nabla \varphi_N(X_N).$$

Для их реализации необходима оценка $[\nabla^2 \phi_N]^{-1}$. При довольно общих предположениях, использующих понятие сингулярного интеграла, можно показать [11], что

(33)
$$\nabla^2 \varphi(x) = p(x)(\hat{f}(x)/n)I + E[v(U,x)]I - nE[v(U,x)\theta\theta^T],$$

где I – единичная матрица, $\hat{f}(x) = f(x) - c$, $\theta = (U - x) / ||U - x||$;

$$v(U,x) = \chi_{R^{n} \setminus S_{\rho}}(U) \frac{\hat{f}(U)}{\omega_{n} ||U - x||^{n}} + \chi_{S_{\rho}}(U) \frac{\hat{f}(U) - \hat{f}(x) \frac{p_{U}(x)}{p_{U}(U)}}{\omega_{n} ||U - x||^{n}},$$

$$\chi_{S_{\rho}}(U) = \begin{cases} 1, & ||U - x|| \leq \rho \\ 0, & ||U - x|| > \rho \end{cases}, \quad \rho > 0,$$

 ω_n – площадь поверхности единичной сферы в R^n .

Можно показать [12, 15], что структура матрицы $\nabla^2 \varphi$ содержит операции растяжения и отражения (соответственно в перспективном и неперспективном направлениях), которые являются основой современных методов оптимизации [22] и позволяют существенно упростить операцию обращения $\nabla^2 \varphi$. Таким образом, эти операции с необходимостью входят в структуру алгоритмов ньютоновского типа (32), не использующих дифференциальные характеристики исходной функции f.

Анализ сходимости методов (30), (32) был проделан в [17], где было показано, что в качестве функции Ляпунова можно использовать потенциал ф.

Отметим в заключение, что к методам второго порядка можно прийти, если вместо $\nabla^2 \phi$ использовать вариацию второго порядка функционала F в (2) [11].

7. Методы возможных направлений

Как было отмечено в разделе 2, вместо градиентного направления Y (максимизирующего $\delta_Y F(X)$), можно использовать такие направления, для которых $\delta_Y F(X) \le 0$. В этом случае получим из (15) и (24), (25), что

(34)
$$\int_{\mathbb{R}^n} (f(x) - c) \Delta \varphi(x) dx \ge 0.$$

Из (34) следует

(35)
$$\Delta \varphi(x) \ge 0, \quad x \in \Omega_{\mathbf{H}} = \{x | f(x) > c\},$$
$$\Delta \varphi(x) \le 0, \quad x \in \Omega_{\mathbf{H}} = \{x | f(x) \le c\}.$$

Следовательно, в неперспективной области $\Omega_{\rm H}$ потенциальная функция ф является субгармонической, в то время как в перспективной области $\Omega_{\rm H}$ – супергармонической [23].

В соответствии с классической теоремой Рисса любая субгармоническая функция может быть представлена в виде суммы гармонической и потенциальной функций [23].

Наличие в структуре субгармонической функции потенциала ϕ показывает, что в структуре векторного поля $\overline{y}(x)$, карактеризующего направление движения, должна присутствовать составляющая $\nabla_x E(x,\zeta) = \omega_n ||x-\zeta||^{-n} (x-\zeta)$. Следовательно, ядро $\nabla_x E(x,\zeta)$ образует структурную (универсальную) составляющую процедур нелокального поиска, использующих как градиентные, так и в общем случае возможные направления.

Проанализируем особенности потенциальной функции более подробно. Разобьем ф на две составляющие:

(36)
$$\varphi(x) = \int_{\Omega_{\Pi}} E(x,\zeta)\tilde{f}(\zeta)d\zeta + \int_{\Omega_{H}} E(x,\zeta)\tilde{f}(\zeta)d\zeta = \varphi_{\sharp}(x) + \varphi_{H}(x),$$

где
$$\tilde{f}(\zeta) = (f(\zeta) - c)p_U(\zeta)$$
.

Очевидно, что функция $\phi_{\pi}(x)$ является в R^n супергармонической (гармонической в $\Omega_{\rm H}$), а функция $\phi_{\rm H}(x)$ — субгармонической в R^n (в Ω_{π} — гармонической). В результате векторное поле $\overline{y}(x)$ представится в виде

(37)
$$p(x)\overline{y}(x) = \nabla \varphi_{n}(x) + \nabla \varphi_{n}(x).$$

Если поисковая точка x оказывается в неперспективном множестве $\Omega_{\rm H}$, то $\delta_Y F(X)=0$ для $\nabla \phi_{\rm II}$, так как $\phi_{\rm II}$ гармонична в $\Omega_{\rm H}(\Delta \phi_{\rm II}(x)=0,x\in\Omega_{\rm H})$. Поэтому ограничимся здесь (т.е. в $\Omega_{\rm H}$) составляющей направления движения $\nabla \phi_{\rm II}$, субгармонична. В силу принципа максимума для субгармонических функций [23, 24] максимальное значение $\phi_{\rm H}$, равное нулю (так как $f(x)-c\geqslant 0$ и $E(x,\zeta)<0$ для $x\in\Omega_{\rm H}$), не достигается внутри области $\Omega_{\rm H}$. Таким образом, поисковые движения, осуществляемые в направлении $\nabla \phi_{\rm H}$ (т.е. соответствующие максимизации $\phi_{\rm H}.(x)$), приводят к "выталкиванию" поисковой точки из неперспективной области $\Omega_{\rm H}$ Так как максимизация $\phi_{\rm H}$ эквивалентна нахождению таких точек x, для которых $\phi_{\rm H}=0$, то плотность $p_U(x)$ целесообразно концентрировать именно в этих точках, что соответствует решению уравнения $E(x_0,\zeta)$ ($f(\zeta)-c)=0$, где x_0 — реализация текущего случайного вектора X_0 (т.е. в

окрестности локального минимума f). Тогда член $||x_0 - \zeta||^{n-2}$ в знаменателе $E(x_0, \zeta)$ и будет обеспечивать выталкивание поисковой точки из окрестности локальных минимумов. В этом идея туннельных алгоритмов [25].

В заключение отметим, что использование ньютонова потенциала (27) является, очевидно, не единственным способом обеспечить неравенство $\delta_Y F(X) \le 0$. В частности, волновой потенциал $\psi(x)$, который является решением волнового уравнения [24, 26]

(38)
$$\Delta \psi(x) + \omega^2 \psi(x) = (f(x) - c) p_U(x),$$

также может служить как основа для развития нелокальных методов поиска [11, 17].

8. Граничные условия

На этапе постановки задачи или обработки текущей информации в процессе решения задачи область поиска может сужаться, т.е. в общем случае нужно решать задачу (7), а не (2). В этом случае производная по направлению будет иметь вид

(39)
$$\delta_{Y}F(X) = \int_{\Omega} (\nabla f(x), p(x)\overline{y}(x))dx.$$

Используя формулу Стокса, получим

$$\delta_{\gamma}F(X) = \int_{\partial\Omega} (f(x) - c)(p(x)\overline{y}(x), n(x))ds - \int_{\Omega} (f(x) - c)\operatorname{div}[p(x)\overline{y}(x)]dx,$$

где n(x) – единичная нормаль к границе $\partial\Omega$. Отсюда и из представления (24), (25) будем иметь

(40)
$$\delta_Y F(X) = \int_{\partial \Omega} (f - c) (\frac{\partial \varphi}{\partial n} + w_n) ds - \int_{\Omega} (f - c) \Delta \varphi dx,$$

где $\partial \varphi / \partial n = (\nabla \varphi(x), n(x)), \quad w_n = (w(x), n(x)).$

Условие улучшения $\delta_Y F(X) \le 0$ для (40) приводит в этом случае к краевой задаче Неймана [24] (при $w_n = 0$):

(41)
$$\Delta \varphi(x) = (f(x) - c) p_U(x), \quad x \in \Omega,$$
$$\partial \varphi(x) \partial n = -(f(x) - c) p_V(x), \quad x \in \partial \Omega,$$

где $p_U(x)$, $p_V(x)$ — некоторые неотрицательные функции, которые могут интерпретироваться как плотности распределения вероятностей случайных векторов U и V, выбираемых на основе текущей информации в процессе решения задачи.

Таким образом, краевая задача Неймана естественно возникает в процессе построения потенциального поля для нелокального поиска.

Можно также рассмотреть и краевую задачу Дирихле

(42)
$$\Delta \varphi(x) = (f(x) - c) p_U(x), \quad x \in \Omega,$$
$$\varphi(x) = -(f(x) - c) p_V(x), \quad x \in \partial \Omega.$$

Однако в этом случае граничное условие постулируется (несколько искусственно), в отличие от (41), где оно выводится из (40).

Решение краевых задач (41), (42) может быть получено с помощью функции Грина. Таким образом, в общем случае универсальная составляющая нело-кального поиска, определяемая ядром в (27), заменяется функцией Грина $G(x, \zeta)$.

9. Учет дифференциальных свойств оптимизируемой функции

В предыдущих построениях информация о дифференциальных свойствах f не использовалась. Если такая информация имеется, то для ее учета перепишем (30) в виде

(43)
$$\nabla \varphi(x) = -\lambda \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_{\zeta} E(x,\zeta) (f(\zeta) - c) p_U(\zeta) d\zeta$$

и, применяя к (43) формулу Грина, получим

$$\nabla \varphi(x) = -\lambda \int_{\mathbb{R}^n} \nabla [(f(\zeta) - c) p_U(\zeta)] E(x, \zeta) d\zeta$$

или, окончательно,

(44)
$$\nabla \varphi(x) = -\lambda \int_{\mathbb{R}^n} E(x,\zeta) \nabla f(\zeta) p_U(\zeta) d\zeta - \lambda \int_{\mathbb{R}^n} E(x,\zeta) (f(\zeta) - c) \nabla p_U(\zeta) p_U(\zeta) d\zeta.$$

Таким образом, локальная информация о ∇f (первый член в (44)) добавляется ко второму "нелокальному" члену в (44).

10. Структурные составляющие нелокального поиска

Проанализируем последовательность предположений и построений, приведших к определению потенциала и алгоритмов его минимизации. Прежде всего отметим, что переход от исходной задачи к рандомизированной является в рассматриваемом случае эквивалентным (в смысле асимптотического решения) и лишь расширяет возможности построения процедур нелокального поиска. Последующие построения делались также при естественных и неограничивающих предположениях (типа существования интеграла или законности операции дифференцирования интеграла по параметру). Поэтому можно говорить о структурных (универсальных) составляющих, с необходимостью присутствующих в процедурах нелокального поиска.

Действительно, анализ построений (1) – (30), приведших к построению потенциала, показывает, что ядро $E(x,\zeta)$ (или в общем случае функция Грина $G(x,\zeta)$) является такой универсальной составляющей нелокального поиска, не зависящей ни от способа рандомизации, ни от выбора конкретной целевой функции f. Анализ производных первого порядка этого ядра показывает, что в нелокальном поиске с необходимостью присутствует неустойчивая составляющая в неперспективной области, а анализ производных второго порядка приводит (также с необходимостью) к операциям растяжения — отражения пространства в нелокальном поиске.

В заключение кратко остановимся на роли векторного поля w(x) в нелокальном поиске. Подставляя (24), (25) в (18), (22) и предполагая, что $\Delta \phi(x) = 0$, получим, что $\delta_Y F(X) = 0$. Таким образом, движение, которое определяется векторным полем w(x), не меняет среднего значения функции и необходимо для накопления знаний о ней. Поэтому неоднозначность представления (24), (25), связанная с выбором w(x), может рассматриваться как своего рода "плата" за отсутствие априорной информации о наблюдаемой функции.

11. Заключение

В настоящей работе основное внимание было уделено теоретическим аспектам рассматриваемого направления. Численные методы подробно рассмотрены в [12, 13]. Следует отметить преемственность этих алгоритмов (на уровне основных операций или структурных составляющих) с известными детерминированными аналогами (методы первого и второго порядка, сопряженных направлений, растяжения пространства, эллипсоидов и др.). При этом в алгоритмах, основанных на использовании потенциальной функции, вычисляются лишь значения исходной целевой функции.

Наконец, в заключение отметим, что в этой работе использовался потенциал, зависящий от интегральных свойств оптимизируемой функции $\varphi = \varphi(x; c)$. $c = \int f(x)p_U(x)dx$. Возможно построение потенциальной функции, зависящей от усредненного решения ("центра" аппроксимации): $\varphi = \varphi(x, \overline{x})$; $\overline{x} = \int xp_U(x)dx$. В этом случае соответствующие методы будут близки к методам локальной аппроксимации [27] или проекционным и ядерным оценкам плотности [28] и кратко рассмотрены в [29].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fromovitz S. Nonlinear programming with randomization // Management Sci.1965. V. 11. No. 9. P. 831-846.

- 2. *Каплинский А.И.*, *Пропой А.И*. О стохастическом подходе к задачам нелинейного программирования // AuT. 1970. № 3. С. 122–133.
- 3. *Ермольев Ю.М.* Об одной общей задаче стохастического программирования // Кибернетика. 1971. № 3. С. 47–50.
- 4. Юдин Д.Б. Математические методы управления в условиях неопределенности. М.: Советское радио, 1974.
- 5. *Каплинский А.И.*, *Позняк А.С.*, *Пропой А.И.* Условия оптимальности для некоторых задач стохастического программирования // AuT. 1971. № 8. С. 51–60.
- 6. Каплинский А.И., Позняк А.С., Пропой А.И. О некоторых методах решения задач стохастического программирования // АиТ. 1971. № 10. С. 87–94.
- 7. Цыпкин Я.З. Адаптация и обучение в автоматических системах. М.: Наука, 1968.
- 8. Айзерман М.А., Браверман Э.М., Розоноэр Л.И. Методы потенциальных функций в теории обучения машин. М.: Наука, 1970.
- 9. Пропой А.И., Пухликов А.В. Основания математической теории систем. М.: ВНИИСИ, 1990.
- 10. Каплинский А.И., Лимарев Е.Е., Чернышева Г.Д. Построение рандомизированных алгоритмов оптимизации // Проблемы случайного поиска. 1980. Вып. 8. С. 63–91.
- 11. Каплинский А.И., Пропой А.И. Вариационный подход к построению алгоритмов нелокальной оптимизации. М.: ВНИИСИ, 1986.
- 12. Каплинский А.И., Пропой А.И. Структурные составляющие методов нелокального поиска, использующих теорию потенциала. М.: ВНИИСИ, 1990.
- 13. Каплинский А.И., Пропой А.И. Конструирование вычислительных алгоритмов нелокального поиска, использующих теорию потенциала. М.: ВНИИСИ, 1990.
- 14. Гиль А.Б., Каплинский А.Й., Пропой А.И. Построение вычислительных схем нелокальной оптимизации на основе теории потенциала // Статистические методы и модели. Сб. трудов. М.: ВНИИСИ. 1987. Вып. 1. С. 11–23.
- 15. Гиль А.Б., Каплинский А.И., Пропой А.И. Об использовании теории потенциала в вариационном подходе к построению алгоритмов оптимизации, использующих операции отражения и растяжения // Модели и методы оптимизации. Сб. трудов. М.: ВНИИСИ. 1987. Вып. 11. С. 72–78.
- 16. Каплинский А.И., Пропой А.И. О градиентной основе негладкой оптимизации, использующей теорию потенциала // Задачи и методы оптимизационного моделирования. Сб. трудов. М.: ВНИИСИ, 1988. Вып. 13. С. 11–16.
- 17. Каплинский А.И., Песин А.М., Пропой А.И. О методах нелокального поиска // Модели и методы оптимизации. Сб. трудов. М.: ВНИИСИ, 1991. Вып. 11. С. 35 45.
- 18. Егоров Ю.В. Линейные дифференциальные уравнения главного типа. М.: Наука, 1984.
- 19. Закс Ш. Теория статистических выводов. М.: Мир, 1975.
- 20. *Красовский А.А.* Непрерывные алгоритмы и стохастическая динамика поиска экстремума // АиТ. 1991. № 4. С. 55–65.
- 21. Невельсон М.Б., Хасьминский Р.З. Стохастическая аппроксимация и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1972.
- 22. *Шор Н.З.* Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. Киев: Наукова думка, 1979.
- 23. Хейман Х., Кеннеди П. Субгармонические функции. М.: Мир, 1980.
- 24. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972.
- 25. Levi A.V., Montalvo A. The tunneling algorithm for the global minimization of functions /i SIAM J. Sci. Comp. 1985. V. 6. № 1. P. 15–29.
- 26. Санчес-Паленсия Э. Неоднородные среды и теория колебаний. М.: Мир, 1984.
- 27. *Катковник В.Я.* Линейные оценки и стохастические задачи оптимизации. М.: Наука, 1976.
- 28. Деврой Л., Дьерфи Л. Непараметрическое оценивание плотности. М.: Мир, 1988.
- 29. Пропой А.И. О некоторых принципах нелокального поиска // Оптимизация и управление в сложных системах. Сб. трудов М.: ВНИИСИ, 1986. Вып. 4. С. 67–80.

Поступила в редакцию 25.06.92.